

**ТЕРМОДИНАМИКА ОКИСЛЕНИЯ-ВОССТАНОВЛЕНИЯ
И ХИМИЯ ДЕФЕКТОВ ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ***Цветков Д.С., Серeda В.В., Малышкин Д.А., Иванов И.Л.,**Цветкова Н.С., Зувев А.Ю.*Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Оксиды привлекают внимание исследователей как материалы для самых передовых технологий и устройств, в том числе связанных с получением и преобразованием энергии. В этом контексте оксидные материалы интенсивно изучаются для использования в топливных элементах, мембранах для парциального окисления углеводорода, разделения газов и электрохимического синтеза, устройствах для расщепления воды, основанных на термохимических циклах, и во многих других приложениях.

Наибольший интерес для отмеченных практических приложений представляют оксидные материалы, обладающие высокой смешанной (ионно-электронной) электропроводностью и способные к обратимому поглощению-выделению кислорода. Последнее свойство обуславливает, как непосредственное применение оксидных материалов, например, в термохимическом цикле расщепления воды, так и сильную зависимость их состава, а значит и других характеристик, от условий (температура, состав окружающей атмосферы) эксплуатации. Изучение термодинамики процессов окисления-восстановления оксидных материалов, таким образом, приобретает особое значение, как с практической точки зрения, так и с фундаментальной, поскольку является источником информации о реальной (дефектной) структуре.

Чаще всего термодинамические характеристики окисления-восстановления оксидных материалов определяют через анализ зависимости различных свойств оксидов от внешних параметров (например, зависимости общей электропроводности или кислородной нестехиометрии от парциального давления кислорода и температуры). Такой путь можно назвать непрямым или косвенным определением. На этом пути, однако, имеется ряд «подводных камней», препятствующих надежному определению искомых термодинамических характеристик. Вторым способом является прямое определение искомых величин термохимическими методами. Этот путь применяется значительно реже как в силу объективной трудоёмкости самого метода, так и некоторой ограниченности круга соединений, пригодных для исследования. Необходимо также отметить, что анализ результатов, полученных как первым, так и вторым методами, основан на привлечении представлений о точечных дефектах и их равновесии в твердом теле.

Таким образом, в докладе на ряде практических примеров будут продемонстрированы возможности обоих указанных методов определения термодинамических параметров процесса окисления-восстановления и приложение этих методов к анализу реальной (дефектной) структуры оксидных материалов.